データ駆動型 AI セミナー

信州大学 アクア・リジェネレーション機構（ARG）は下記のセミナーを企画いたしました。皆様のご参加をお待ちしております。

日　時　：2025 年 11 月 27 日（木）　16:00～

場　所　：信州大学長野(工学)キャンパス
AICS4 階コミュニケーションルーム
Google Meet（参加ご希望の方はお問い合わせください）

講　演　：岡崎 圭一 准教授（分子科学研究所 計算科学研究センター）
「Elucidating and Controlling Functional Dynamics of Biomolecular Machines Using Molecular Simulations and Machine Learning」

要　旨　：Biomolecular machines, such as motor and transporter proteins, change conformations when they function. First, I will introduce approaches for predicting conformational changes using the structure-prediction AI AlphaFold, with modifications to its procedure. Second, I will present approaches that integrate AlphaFold with molecular dynamics simulations to validate predicted structures and obtain physical properties, such as free energy. Third, I will introduce an approach combining molecular simulations with machine learning for estimating reaction coordinates that precisely capture the transition dynamics of conformational changes. This approach enables us to control the speed of a transporter protein, which was validated by experiments.

お問い合わせ：taborosi_attila@shinshu-u.ac.jp